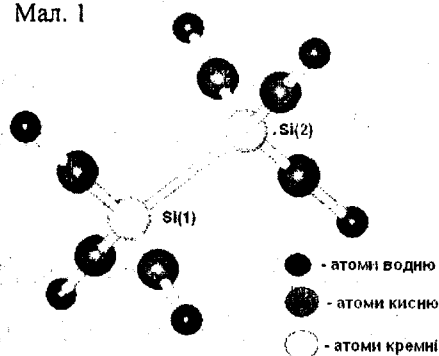


МОДЕЛЬ НЕЙТРАЛЬНОЇ КИСНЕВОЇ ВАКАНСІЇ В β -КРИСТАБОЛІТІ.

Використовуючи метод Хюнкеля в наближенні МО ЛКАО в базисі

Мал. 1

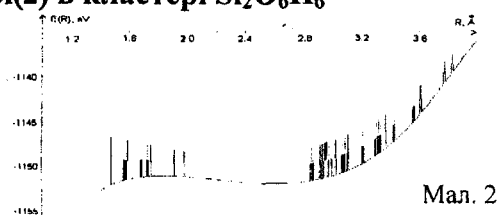


симетризованих орбіталей, ми досліджували нейтральну кисневу вакансію в β -кристаболіті, що є однією з кристалічних форм оксиду кремнію SiO_2 . Даний дефект моделювали за допомогою О-центрованого кластера $\text{Si}_2\text{O}_6\text{X}_6$ (де X_i – граничні атоми кластеру)(див. мал. 1), в якому відсутній центральний атом кисню. Оптимізація геометрії

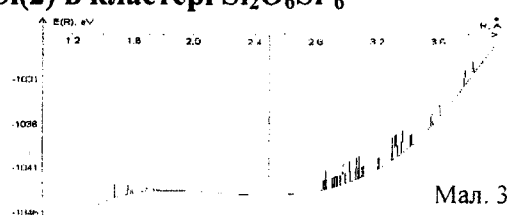
досліджуваної моделі проводилась при врахуванні лише зміщення сусідніх з вакансією атомів кремнію. Граничні умови враховувались поміщенням на обірвані зв'язки атомів водню ($\text{Si}_2\text{O}_6\text{H}_6$ – кластер) та атомів кремнію ($\text{Si}_2\text{O}_6\text{Si}^*$ – кластер). В граничних атомах кремнію Si^* для насичення обірваних зв'язків розглядалося лише по одному електрону на $3p_z$ атомній орбіталі. При обрахунках ми використовували валентний набір базисних функцій, тобто $3s$ і $3p$ атомні орбіталі (АО) кремнію, $2s$ і $2p$ АО кисню. АО вибирали у вигляді функцій Слетера. Вибраний нами кластер $\text{Si}_2\text{O}_6\text{X}_6$ має симетрію точкової групи D_{3d} . Враховуючи симетрію кластера, ми переходили від валентного базисного набору до базисного набору симетризованих орбіталей (СО). Матричні елементи фокіана брались у вигляді запропонованому Кюсаком (*L.C. Cusachs, B.B. Cusachs, J. Chem. Phys., 71, 1069 (1967)*).

Ми отримали залежність повної електронної енергії від відстані між атомами $\text{Si}(1)$ і $\text{Si}(2)$. Для кластерів $\text{Si}_2\text{O}_6\text{H}_6$ та $\text{Si}_2\text{O}_6\text{Si}^*$ цю залежність дано на мал.2 та мал.3.

Залежність повної електронної енергії від відстані між атомами $\text{Si}(1)$ та $\text{Si}(2)$ в кластері $\text{Si}_2\text{O}_6\text{H}_6$



Залежність повної електронної енергії від відстані між атомами $\text{Si}(1)$ та $\text{Si}(2)$ в кластері $\text{Si}_2\text{O}_6\text{Si}^*$



Кути між атомами кремнію та кисню, відстані між ними, що відповідають шуканій моделі, дано відповідно в таблицях 1 і 2.

Таб 1. Просторове розміщення атомів в кластері $\text{Si}_2\text{O}_6\text{H}_6$.

Відстань $\text{Si}(1)\text{-Si}(2)$, \AA	Відстань Si-O , \AA	Кут $\text{Si}(2)\text{-Si}(1)\text{-O}$, град.
2.61	1.65	117.5

Таб. 2. Просторове розміщення атомів в кластері $\text{Si}_2\text{O}_6\text{Si}^*_6$.

Відстань $\text{Si}(1)\text{-Si}(2)$, \AA	Відстань Si-O , \AA	Кут $\text{Si}(2)\text{-Si}(1)\text{-O}$, град.
2.49	1.67	119.3

Як видно з отриманих результатів, відстань між атомами кремнію в отриманих моделях нейтральної кисневої вакансії відповідно рівна 2.61\AA для кластера $\text{Si}_2\text{O}_6\text{H}_6$, та 2.49\AA для кластеру $\text{Si}_2\text{O}_6\text{Si}^*_6$.

Отримана нами модель нейтральної кисневої вакансії відповідає релаксованій кисневій вакансії, що підтверджується порівнянням наших результатів з результатами отриманими в роботах інших авторів.